

A
K 642

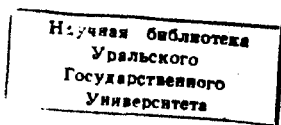
На правах рукописи

Кондрашов Евгений Николаевич

Оптические и фотоэлектронные спектры
диэлектрических купратов.

01.04.07 — Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук



A handwritten signature in black ink, appearing to read "Е. Кондрашов".

Екатеринбург — 2001

Работа выполнена в Уральском государственном университете
на кафедре теоретической физики

Научный руководитель — доктор физико-математических наук,
профессор В.И. Черепанов.

Научный консультант — доктор физико-математических наук,
профессор А.С. Москвин.

Официальные оппоненты — доктор физико-математических наук,
профессор А.Е. Никифоров.

доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник,
В.Я. Митрофанов.

Ведущее учреждение — Уральский государственный техниче-
ский университет (УГТУ–УПИ).

Защита состоится «28» июня 2001 г. в 15 часов на
заседании диссертационного совета Д212.286.01 по защите диссертаций
на соискание ученой степени доктора физико-математических наук в
Уральском государственном университете (620083, г.Екатеринбург, К-
83, пр.Ленина 51, комн.248).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Уральского
государственного университета.

Автореферат разослан «28» мая 2001 г.

Ученый секретарь диссертационного совета, доктор физико-
математических наук Н.В. Баранов.



Актуальность темы. Медь-кислородные высокотемпературные сверхпроводники (ВТСП) обладают целым рядом необычных свойств, обусловленных сложным взаимодействием электронных, спиновых и решеточных степеней свободы и существенно отличающих их от обычных металлических сверхпроводников. Несмотря на интенсивные усилия исследователей уже в течение 15-ти лет, однозначная теоретическая интерпретация ряда физических явлений и самого механизма высокотемпературной сверхпроводимости до сих пор не найдена. Более того, многие свойства родительских диэлектрических составов остаются загадочными и по сей день. К таким свойствам, в первую очередь, можно отнести поглощение в среднем ИК-диапазоне, природу края фундаментального поглощения, фотоиндуцированное поглощение и данные фотоэмиссии углового разрешения (ARPES) вблизи уровня Ферми. Природа низкоэнергетических возбуждений в родительских квазидвумерных кристаллах, таких как La_2CuO_4 , $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, и их одномерных аналогов типа Sr_2CuO_2 , Li_2CuO_2 , Sr_2CuO_3 представляет один из наиболее спорных вопросов как в проблеме ВТСП, так и в физике сильнокоррелированных оксидов вообще.

В связи с этим представляется актуальным развитие теоретического подхода, в котором предполагается детальный квантово-химический учет конкретного кристаллического и электронного строения диэлектрических купратов и попытки, в рамках данного подхода, единым образом описать оптические и фотоэлектронные спектры различных диэлектрических купратов. Именно этим вопросам посвящена данная диссертация.

Целью работы является:

1. Разработка полуэмпирической модели электронной структуры диэлектрических купратов, выяснение роли низкоэнергетических чисто кислородных состояний.

2. Расчет и анализ эффектов матричного элемента и поляризационных зависимостей в спектрах фотоэмиссии углового разрешения.
3. Развитие теории экситонов для 0D, 1D и 2D диэлектрических купратов, расчет спектров энергетических потерь электронов и сравнение их с экспериментальными данными.

Научная новизна и практическая значимость:

- впервые, на основе квантово-химических расчетов электронной структуры, рассчитаны одноэлектронные матричные элементы, определяющие интенсивность фототока в ARPES экспериментах;

- показано, что «эффект остаточной поверхности Ферми», наблюдаемый в фотоэмиссионных экспериментах, связан с эффектами матричного элемента;

- выдвинуто предположение, что конечная интегральная интенсивность фототока в центре зоны Бриллюэна (в области $\sim 0.1 - 0.5 \text{ эВ}$) связана с наличием низкоэнергетического состояния типа E_u ;

- развита обобщенная теория экситонов с переносом заряда - одноцентровых (френкелевских) и двухцентровых (как обобщение модели малых экситонов Ханга-Нга), проведена их теоретико-групповая классификация;

- выполнен расчет спектров энергетических потерь электронов в 0D, 1D и 2D диэлектрических купратах и дано сравнение с экспериментальными данными;

- теоретически рассмотрено влияние внешнего электрического поля на дипольно-запрещенные фотопереходы в модели CuO_2 -плоскости (2D-система) и определены ориентационные и поляризационные зависимости возгорающих переходов. Эти зависимости могут быть использованы на практике для идентификации дипольно-запрещенных экситонных фотопереходов. Показано, что идентификация возгорающего пика 1.4 эВ в La_2CuO_4 с переходом $B_{1g} \rightarrow B_{2g}$ в [6] не является однозначной. Предложен способ видоизменения эксперимента, позволяющий отличить переход $B_{1g} \rightarrow B_{2g}$ от $B_{1g} \rightarrow A_{2g}$;

На защиту выносятся:

1. Результаты модельных расчетов матричного элемента, определяющего вероятность фотоионизации CuO_4^{6-} кластера из одночастичных состояний b_{1g} , e_u .
2. Результаты анализа эффектов матричного элемента и поляризационных зависимостей в спектрах фотоэмиссии диэлектрических купратов при рождении больших неадиабатических поляронов.
3. Обобщение теории экситонов с переносом заряда и расчеты оптических спектров диэлектрических купратов.
4. Расчет спектров энергетических потерь электронов в 0D, 1D и 2D диэлектрических купратах и сравнение их с экспериментальными данными.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на ряде российских и международных конференций:

1. XXVIII Всероссийской зимней школе физиков-теоретиков «Коуровка», 28 февраля – 3 марта 2000г., г. Екатеринбург;
2. Молодежной научной школе «Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений», 2–5 ноября 1999г., г. Казань;
3. Всероссийской конференции «Оксиды. Физико-химические свойства», 31 января–4 февраля 2000г., г. Екатеринбург;
4. Международной конференции по электронной структуре и магнетизму сильнокоррелированных систем (CESMCS), 4–7 марта 2001 г., г. Екатеринбург.
5. International Conference on Dynamical Processes in Excited States of Solids, July 1 – 4, 2001, Lyon, France.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 7 работ, список которых приведен в конце автореферата.

Работа выполнена на кафедре теоретической физики Уральского Государственного Университета им. А.М.

Горького при частичной финансовой поддержке гранта Award №REC-005 of the US Civil Research Development Foundation for the Independent States of Former Soviet Union (CRDF) и гранта Министерства образования РФ (грант № E00-3/4-277).

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав с выводами, заключения и изложена на 120 страницах машинописного текста, включая 20 рисунков, 7 таблиц и список литературы, содержащий 99 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ.

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, формулируются основные направления и цели работы, определяется структура диссертационной работы.

В **первой главе** дан обзор экспериментальных данных по фотоэмиссии углового разрешения (ARPES) и спектроскопии энергетических потерь электронов (EELS) для различных диэлектрических купратов (La_2CuO_4 , $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$, Sr_2CuO_2 , Li_2CuO_2 , Sr_2CuO_3). Кроме того, рассмотрены некоторые традиционные теоретические подходы, в рамках которых сегодня обычно анализируются данные по фотоэмиссии и энергетическим потерям электронов. Критикуется подход, весьма часто применяемый к анализу ARPES данных, в котором не учитываются эффекты матричного элемента, что приводит к сомнительному выводу о существовании «остаточной поверхности Ферми» в диэлектрических составах [1].

Подробно рассмотрена модель малых экситонов с переносом заряда, развитая Жангом и Нг [2], с целью объяснения экспериментальных данных по энергетическим потерям электронов в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$. Показано, что в работе [2] расчет интенсивностей переходов из основного состояния в экситонные был проведен не совсем корректно, в силу того, что не был учтен одноэлектронный матричный элемент.

Кроме того, мы обсуждаем данные экспериментов по EELS в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, выполненные с более высоким разрешением [3]. Эти данные показывают наличие

практически бездисперсионного слабоинтенсивного пика при ~ 2 эВ и не обнаруживают D-экситона (B_{1g} при $k=0$), предсказываемого теорией Жанга-Нга. Мы предполагаем, что переход вблизи ~ 2 эВ связан с одноцентровым переходом $b_{1g} \rightarrow e_u$ в однодырочном кластере CuO_4^{6-} .

Во второй главе мы рассматриваем электронную структуру диэлектрических купратов. Во-первых, мы проводим три типа разбиения CuO_2 -плоскости - а) на перекрывающиеся CuO_4 -кластеры, б) по методу Танаки с сотр. [4], в) на меди и кислородные кластеры. Проводится анализ различных разбиений и рассматриваются ситуации, когда для дальнейших теоретических расчетов и приближений удобно использовать то или иное разбиение.

В рамках модели перекрывающихся кластеров мы проводим ортогонализацию функций Ванье, построенных на полном одночастичном базисе CuO_4 -кластера. Показано, что такой базис является переполненным (так как элементарная ячейка CuO_2 -плоскости содержит два атома, а не 4) и поэтому возможны два случая: 1) когда кислородные функции Ванье имеют локальную симметрию b_{1g} и a_{1g} , либо 2) когда кислородные функции Ванье имеют локальную симметрию e_u . Подчеркнем, что в случае 2) мы имеем одночастичное зонное состояние типа e_u (в центре зоны Бриллюэна), что необходимо для объяснения локализованного перехода при ~ 2 эВ в EELS спектрах [3].

Как легко видеть, состояние типа e_u можно получить и при разбиении CuO_2 -плоскости методом, предложенным в работе Танаки с сотр. [4]. Однако, в этом подходе мы сталкиваемся с проблемой увеличения элементарной ячейки (и соответствующим уменьшение зоны Бриллюэна).

Далее мы рассчитываем энергетический спектр изолированного однодырочного CuO_4 -кластера, определяющего, в итоге, одночастичный спектр медь-кислородных плоскостей. На рис.1 мы приводим однодырочный спектр.

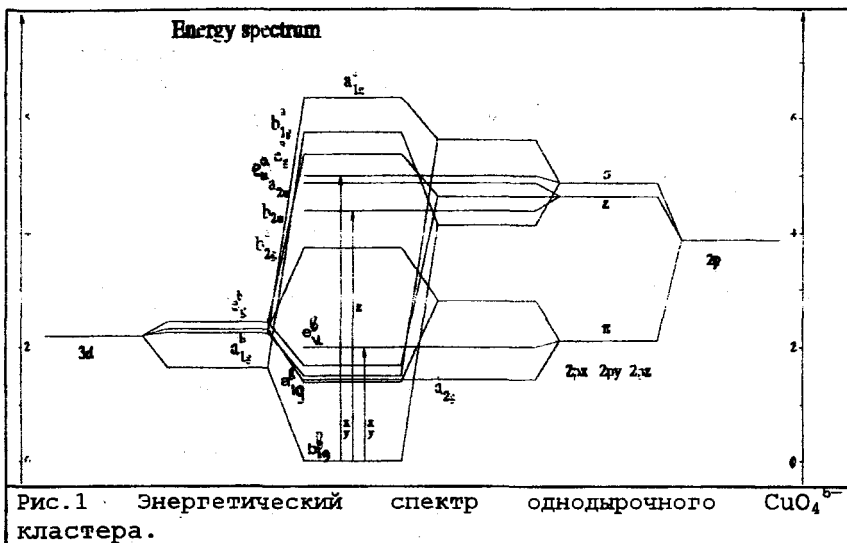


Рис.1 Энергетический спектр однодырочного CuO_4^{5-} кластера.

В заключение второй главы мы обсуждаем энергетический спектр двухдырочного кластера CuO_4^{5-} . Знание этого спектра необходимо для понимания и конкретного расчета спектров фотоэмиссии углового разрешения и энергетических потерь электронов, обсуждаемых в следующих главах.

В третьей главе рассматривается влияние k -зависимости матричного элемента на теоретическую интерпретацию данных ARPES экспериментов, выполненных на диэлектрических купратах. Дело в том, что, как уже упоминалось выше, большинство теоретических работ по интерпретации фотоэмиссионных спектров, как в диэлектрических составах, так и в металлических и сверхпроводящих фазах ВТСП, основывается на ряде предположений. Наиболее существенные из этих предположений, на наш взгляд, следующие:

1. Спектры фотоэмиссии в широком спектральном диапазоне могут быть описаны в рамках обычной зонной теории. Электронная структура и энергетический спектр вблизи уровня Ферми формируются квазичастицами Ландау со статистикой Ферми, заполняющими

некоторую зону. В этой роли для систем типа купратов традиционно выступают допированные дырки или фотодырки.

2. Положение пиков интенсивности фототока однозначно связывается с положением пиков спектральной плотности квазичастиц.
3. Кроме того, зачастую проводят непосредственное сравнение спектральной функции и экспериментально измеренной интенсивности фототока, предполагая, что имеет место соотношение

$$I(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{e}) \propto A(\omega, \mathbf{k}), \quad (1)$$

где $A(\omega, \mathbf{k})$ - спектральная функция. Как легко видеть, в таком подходе полностью пренебрегается зависимостью фототока от поляризации падающих фотонов. Реально же, общее выражение для фототока имеет более сложную структуру.

Последнее предположение, по всей видимости, приводит к наиболее существенной потере информации об электронной структуре вблизи уровня Ферми, которую содержат экспериментальные данные. Дело в том, что полное выражение для фототока в рамках кластерного подхода можно представить в виде

$$I(\omega, \mathbf{k}, \mathbf{e}) \propto \sum_{\gamma} |M_{\gamma}(\mathbf{k}, \mathbf{e})|^2 A_{\gamma}(\omega, \mathbf{k}), \quad (2)$$

где индекс γ нумерует электронные орбитали, $A_{\gamma}(\omega, \mathbf{k})$ - соответствующая спектральная функция, $M_{\gamma}(\mathbf{k}, \mathbf{e})$ - матричный элемент оператора взаимодействия вещества с фотоном имеющим поляризацию \mathbf{e} , частоту ω и волновой вектор \mathbf{k} . Этот матричный элемент определяет процесс фотоионизации кластера, то есть процесс удаления на бесконечность электрона из орбитали γ в кристалле. Замена матричного элемента в (2) на константу приводит к тому, что все особенности поведения интенсивности ARPES сигнала приписываются

спектральной функции, то есть непосредственно поведению электронной подсистемы кристалла. Так, в ВТСП, наличие «слабоинтенсивных областей» фототока в высокосимметричных точках зоны Бриллюэна часто объясняется т.н. «карманами» на поверхности Ферми. Выяснение роли матричного элемента в выражении (2) и учета его k -зависимости при интерпретации данных фотоэмиссии углового разрешения в диэлектрических купратах и являлось целью нашего исследования в настоящей главе.

В первом разделе мы рассматриваем структуру фотодырки в CuO_2 -плоскости. Предполагается, что фотодырка образует большой неадабатический полярон, в котором дырочная плотность распределена по конечному числу CuO_4 -центров (реально в работе рассмотрена ситуация, когда дырка «размазана» по 4-ем центрам). Для описания распределения дырочной плотности мы вводим форм-факторы $f_{\Gamma}^i(\mathbf{k})$ (здесь Γ - неприводимое представление группы D_{4h} , по которому преобразуется волновая функция полярона, i - неприводимое представление, по которому преобразуются волновые функции фотодырки на кластерах, из которых составлен полярон), которые в конечном счете дают вклад в матричный элемент и определяют структуру поведения фототока как функции волнового вектора в зоне Бриллюэна. Здесь же мы рассматриваем два предельных случая, когда фотодырка локализована на одном CuO_4 -кластере, и, когда она делокализована в блоховское (зонное) состояние.

Во втором разделе мы рассматриваем общее выражение для тока фотоэмиссии (2). При этом мы представляем матричный элемент, входящий в выражение (2), в виде произведения форм-фактора полярона и одноэлектронного матричного $M_i(\mathbf{k}, \mathbf{e})$:

$$M_{\Gamma}(\mathbf{k}, \mathbf{e}) = \sum_i f_{\Gamma}^i(\mathbf{k}) M_i(\mathbf{k}, \mathbf{e}). \quad (3)$$

Одноэлектронный матричный элемент определяется следующим образом:

$$M_i(\mathbf{k}, \mathbf{e}) = \langle e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} | (\mathbf{e}\mathbf{r}) | \psi_i(\mathbf{r}) \rangle, \quad (4)$$

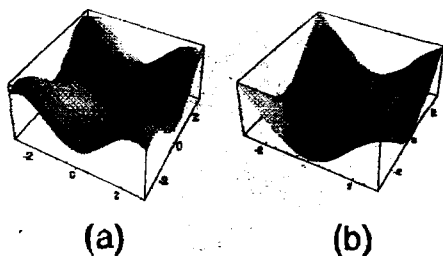
где $\psi_i(\mathbf{r})$ есть одноэлектронная орбиталь типа i CuO_4^{6-} -кластера.

В третьем разделе мы рассчитываем одноэлектронные матричные элементы (4) для связывающих b_{1g} , e_u состояний CuO_4 -кластера, на основе волновых функций полученных во второй главе при расчете однодырочного спектра этого кластера. На рис.2 мы показываем поведение усредненных по поляризациям фотона (предполагается, что вектор поляризации лежит в CuO_2 -плоскости) одноэлектронных матричных элементов.

Рис.2 \mathbf{k} -зависимость усредненных по поляризациям одноэлектронных матричных элементов:

а) b_{1g} ;

б) e_u .



Замечательным оказывается тот факт, что значение фототока для b_{1g} -орбитали в центре зоны Бриллюэна обращается в нуль (как и для любого другого четного состояния), в то время как для e_u -состояния интенсивность фототока оказывается конечной. Заметим, что в ситуации, когда фотодырка локализована на одном кластере или «размазана» в зонное состояние, интенсивность фототока непосредственно определяется квадратом модуля одноэлектронного матричного элемента (4).

В четвертом разделе третьей главы мы рассматриваем поведение интенсивности фотозмиссии локализованных больших поляронов. Предположение о локализации приводит к тому, что спектральная функция как функция волнового вектора остается

постоянной в пределах первой зоны Бриллюэна. Такое предположение позволяет наиболее отчетливо выделить те черты ARPES спектров, которые непосредственно определяются эффектами матричного элемента (3). На рис.3 мы приводим поведение усредненных по поляризациям фотона (предполагается, вектор поляризации лежит в SiO_2 -плоскости) квадратов модулей матричных элементов больших поляронов (число кластеров = 4) с симметрией $\Gamma = B_{1g}, E_u$, построенных из однодырочных состояний с $i = b_{1g}, e_u$.

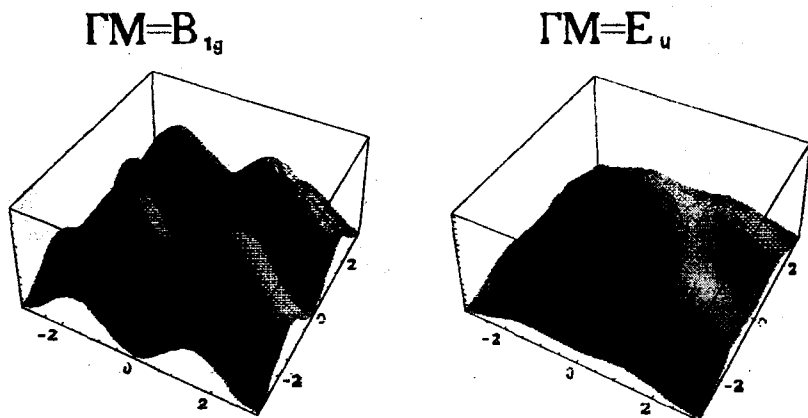


Рис.3 Угловая \mathbf{k} -зависимость фототока больших поляронов: для $\Gamma = B_{1g}$ (справа) и для $\Gamma = E_u$ (слева).

Интенсивность фототока в центре зоны Бриллюэна для $\Gamma = B_{1g}$ обращается в нуль, несмотря на то что спектр содержит нечетное одночастичное состояние. Такое поведение является следствием симметрии распределения фотодырки в поляроне, которая, в свою очередь, определяется форм-фактором. Для $\Gamma = E_u$, очевидно, интенсивность в Γ -точке остается конечной. Такое поведение наблюдается

экспериментально, поэтому мы подтверждаем предположение [5], что вблизи синглета Жанга-Райса должно лежать нечетное состояние. В пятом разделе мы рассматриваем поляризационные зависимости фототока, а затем делаем выводы.

Четвертая глава посвящена построению теории экситонов в низкоразмерных оксидах меди. Мы вводим два типа экситонов:

1. Одноцентровые экситоны, которые соответствуют движению по кристаллу одноцентрового возбуждения $b_{lg}^b \rightarrow \mu\mu$ (здесь $\mu\mu$ - возбужденное состояние кластера CuO_4^{6-}). Дипольно-разрешенными являются одноцентровые экситоны, соответствующие переходам в нечетные состояния $e_u^{b,a}$. По всей видимости, такие переходы должны быть сильно подавлены за счет наличия эффекта Яна-Теллера в возбужденном состоянии и, как следствие, достаточно локализованы. Согласно расчетам, проведенным во второй главе, переход $b_{lg}^b \rightarrow e_u^b$ имеет энергию ~ 2 эВ. И действительно, вблизи этой энергии Й. Финк с сотрудниками в экспериментах по неупругому рассеянию электронов в $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ наблюдали слабоинтенсивную и практически локализованную спектральную линию. Отметим, что одноцентровые экситоны напоминают френкелевские экситоны в молекулярных кристаллах.
2. Двухцентровые экситоны, соответствующие переносу дырки из одной ячейки в соседнюю с образованием в последней двухдырочного состояния. Электростатическое взаимодействие связывает эти две ячейки и такое гибридное бестоковое состояние движется по кристаллу. Впервые для купратов такие экситоны были введены Жангом и Нг [2]. Кроме того, Жанг и Нг предполагали, что двухдырочное состояние может иметь

конфигурацию только типа $(b_{lg}^b)^2$. Мы же рассматриваем всевозможные двухчастичные конфигурации $(b_{lg}^b \gamma \mu)$. Можно сказать, что предложенная нами теория является обобщением «одноконфигурационной» теории Жанга-Нг.

В первом разделе четвертой главы мы даем теоретико-групповую классификацию синглетных экситонных состояний в тетрагональной группе D_{4h} , рассматриваем анизотропию и плеохроизм экситонных фотопереходов и влияние внешнего электрического поля на дипольно-запрещенные фотопереходы. Последние наблюдаются в экспериментах по электроотражению и изучение их дает важную информацию о распределении электронной плотности в четных состояниях кластера CuO_4^{6-} .

Для построения теории двуцентровых экситонов мы во втором разделе четвертой главы рассматриваем энергетический спектр электронных состояний изолированного кластера Cu_2O_7 с одной и двумя дырками. Рассматривается взаимосвязь между молекулярными орбиталями двух кластеров CuO_4 и молекулярными орбиталями кластера Cu_2O_7 . Далее мы анализируем простую двуцентровую модель с двумя дырками, описываемую гамильтонианом модели Хаббарда с учетом межцентрового кулоновского отталкивания.

Третий раздел четвертой главы непосредственно посвящен теории экситонов. Сначала мы рассматриваем одноцентровые экситоны в пренебрежении экситон-фононным взаимодействием и вычисляем матричные элементы оптических и EELS-переходов. Затем мы переходим к рассмотрению двуцентровых экситонов и вновь вычисляем матричные элементы оптических и EELS-переходов. В качестве примера мы рассматриваем три типа двуцентровых экситонов - $(b_{lg}^b b_{lg}^b)$, $(b_{lg}^b a_{lg}^b)$ и $(b_{lg}^b e_{\pi}^b)$.

В четвертом разделе четвертой главы мы

рассматриваем динамику как одноцентровых, так и двухцентровых экситонов указанного типа.

И, наконец, в пятом разделе мы даем сравнение развиваемой теории с экспериментальными данными по EELS 1D и 2D системам, вычисляя функцию потерь. Результат расчета для двумерной системы вдоль направлений $[100]$ и $[110]$ в зоне Бриллюэна мы показываем на рис.4. Для расчетов мы использовали максимально упрощенную модель. Мы предполагали, что экситонные моды, соответствующие различным одночастичным дырочным состояниям (b_{1g} , a_{1g} и e_u) не смешиваются. Весьма замечательно, что теория в таком простом варианте в состоянии объяснить многие экспериментальные факты, такие как, падение интенсивности при движении от центра зоны Бриллюэна к границе, «широкую» дисперсию вдоль направления $[110]$ и некоторые другие. Оказывается, что большая дисперсия вдоль направления $[110]$ и большая величина полной ширины экситонной зоны (~ 3 эВ), получаемая в рамках модели Жанга-Нг, в нашей модели объясняется конкуренцией вкладов в EELS спектр от различных экситонных мод.

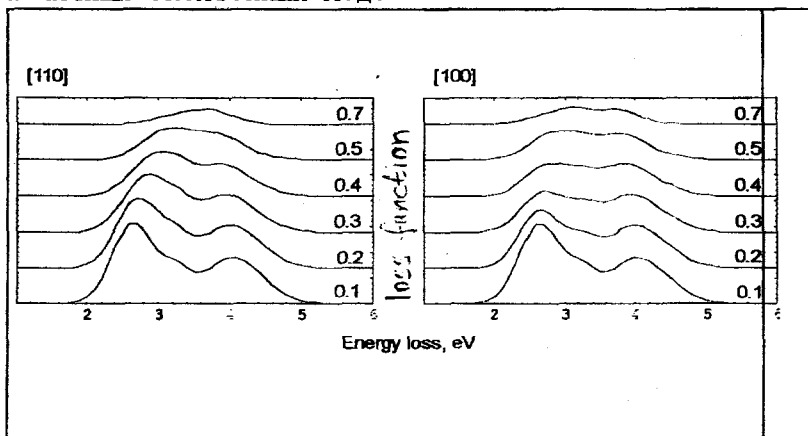


Рис.4. Функция потерь для 2D системы: вдоль $[110]$ (слева) и вдоль $[100]$ (справа). Цифры рядом с кривыми показывают величину вектора рассеяния в \AA^{-1} .

Для полноты картины мы показываем дисперсионные кривые в обсуждаемых направлениях зоны Бриллюэна на рис.5.

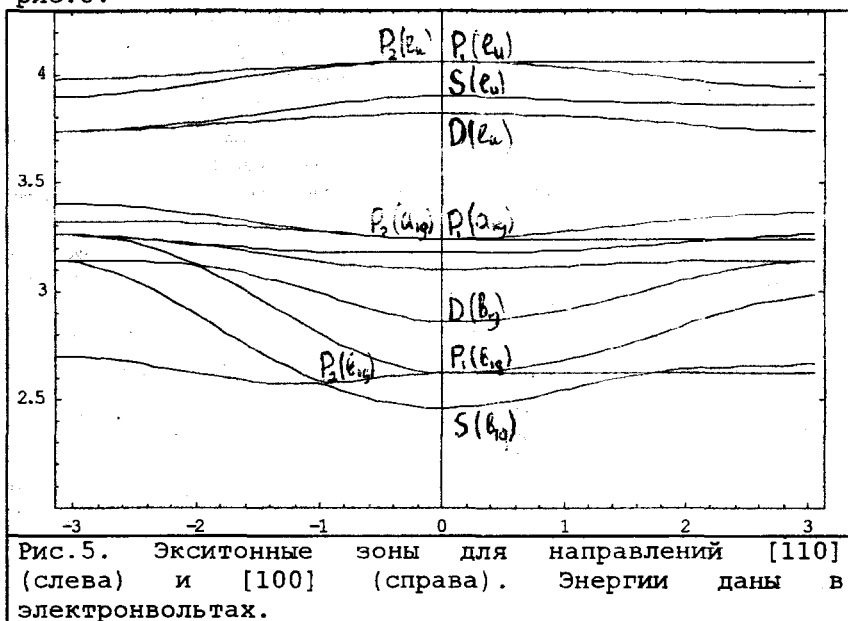


Рис.5. Экситонные зоны для направлений [110] (слева) и [100] (справа). Энергии даны в электронвольтах.

Заметим, что при одних и тех же параметрах модели мы получаем хорошее согласие с экспериментальными данными как для двумерных, так и для одномерных систем, что, по нашему мнению, указывает на то, что в этих системах работают одинаковые электронные механизмы.

Кроме того, в пятом разделе мы обсуждаем EELS-спектр 0D систем. В данном случае дают вклад только одноцентровые возбуждения. Мы находим, что предлагаемая нами модель достаточно хорошо воспроизводит экспериментально наблюдаемые спектральные зависимости функции потерь при различных значениях вектора рассеяния.

В **заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе:

1. Рассмотрено влияние эффектов матричного

элемента на низкоэнергетические спектры фотоэмиссии углового разрешения и показано, что эффект так называемой «остаточной поверхности Ферми» на самом деле может быть объяснен угловой зависимостью матричных элементов, определяющих интенсивность сигнала фотоэмиссии. Показано, что вблизи синглета Жанга-Райса должно лежать возбужденное состояние типа E_u , благодаря чему наблюдается конечная интенсивность фототока в центре зоны Бриллюэна.

2. Построена обобщенная теория экситонов с переносом заряда в диэлектрических купратах: одноцентровых (френкелевских) и двухцентровых (подобных малым экситонам Жанга-Нг). Проведена их теоретико-групповая классификация. Рассмотрено влияние внешнего электрического поля на дипольно-запрещенные фотопереходы. Дан расчет спектров энергетических потерь электронов для 0D, 1D и 2D систем и проведено сравнение с экспериментом.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

1. Е.Н. Кондрашов, А.С. Москвин, В.И. Черепанов. Энергетические потери электронов и теория экситонов в диэлектрических купратах// Молодежная научная школа «Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений», 2-5 ноября 1999г., Казань (сборник трудов, с.67-69).
2. Е.Н. Кондрашов, А.С. Москвин, В.И. Черепанов. Теория экситонов в диэлектрических купратах// Сборник трудов Всероссийской конференции «Оксиды. Физико-химический свойства», 2000, Екатеринбург
3. В.И. Черепанов, Е.Н. Кондрашов, А.С. Москвин. Симметрия и анизотропный оптический спектр экситонов с переносом заряда в CuO_2 -плоскостях// Сборник трудов Всероссийской конференции «Оксиды. Физико-химический свойства», 2000, Екатеринбург.
4. В.И. Черепанов, Е.Н. Кондрашов, А.С. Москвин.

Симметрия и анизотропный оптический спектр экситонов с переносом заряда в модели CuO_2 -плоскости// ФТТ **42**, №5, 844-849 (2000).

5. А.С. Москвин, Е.Н. Кондрашов, В.И. Черепанов. Эффекты матричного элемента в спектрах фотоэмиссии углового разрешения диэлектрических купратов// ФТТ **43**, №5, 791-797 (2001).

6. В.И. Черепанов, Е.Н. Кондрашов, А.С. Москвин. Анизотропия, плеохроизм дипольно-запрещенных оптических переходов и влияние на них электрического поля в модели CuO_2 -плоскости// Электронный журнал «Исследовано в России», 54, 1999г.
(<http://zhurnal.mipt.rssi.ru/articles/1999/054.pdf>).

7. A.S. Moskvin, E.N. Kondrashov, V.I. Cherepanov. Large non-adiabatic hole polarons and matrix element effects in the angle-resolved photoemission spectroscopy of dielectric cuprates// *Physica B*, to be published.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА.

1. F. Ronning, C. Kim, D.L. Feng, D.S. Marshall, A.G. Loeser, L.L. Miller, J.N. Eckstein, I. Bozovic, Z.-X. Shen. Photoemission Evidence for a Remnant Fermi Surface and a d-Wave-Like Dispersion in Insulating $\text{Ca}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ // *Science* **282**, pp. 2067-2072(1998).

2. F.C. Zhang, K.K. Ng. Theory of Excitons in Insulating Cu-Oxide Plane// *Phys. Rev.*, **B58**, 13520 (1998).

3. J. Fink, R. Neudert, H.C. Schmelz et. al. Title// *Physica B* **237-238**, p.93 (1997).

4. Jiro Tanaka, Koji Kamiya and Chizuko Tanaka. Title// *Physica C* **61**, p.451 (1989); J. Tanaka and C. Tanaka. Title// *J. Phys. Chem. Solids*,

59, p.1861 (1998).

5. Москвин А.С. Природа необычного физического поведения медных оксидов: Препринт. Екатеринбург: УрГУ, 1995. 180с.
6. J.P. Falck, J.D. Perkins, A. Levy, M.A. Kastner, J.M. Graybeal, R.J. Birgenau. Midinfrared electroreflectance in $\text{La}_2\text{CuO}_{4+y}$ // *Phys.Rev.* **B49**, №9, pp. 6246-62 51(1994).

Печать офсетная

Подписано в печ. 23.05.01.

Бумага офсетная. Объем 1,0

Екатеринбург, К-83, пр. Ленина, 51.

Формат 60×84 1/16

Тир. 100 Зак № 145

Типолаборатория УрГУ.